

3. Mathématiques du numérique

Méthodes mathématiques et numériques pour la modélisation de l'océan/atmosphère

Florian Lemarié, INRIA -LJK, Grenoble

Enjeux environnementaux

La prévision à court ou long terme de l'évolution du système climatique (global et local) est au centre d'enjeux socio-économiques majeurs. La compréhension de la circulation océanique et atmosphérique est nécessaire aussi bien à l'échelle de la planète pour étudier les effets à long terme de l'évolution du climat, qu'à l'échelle régionale/côtière pour prédire localement des événements extrêmes notamment (e.g. ; les cyclones, les surcotes/décotes, les vagues "scélérates" etc). Cette nécessité s'est traduite par la mise en place de nombreux centres opérationnels (ECMWF, Météo France, MERCATOR-Océan) et projets internationaux (GIEC, CORDEX, AMMA, VOCALS, consortium TASK (CNRS-IRD-PNUE)) dont il est attendu qu'ils aient un fort relai vers les politiques pour organiser la prévention des risques actuels et futurs.

Contraintes de modélisation

La modélisation des écoulements géophysiques doit tenir compte des particularités de la dynamique observée ; parmi celles-ci, nous pouvons déjà évoquer l'influence de la rotation de la terre ainsi que de la stratification. L'océan et l'atmosphère sont des milieux stratifiés-tournants dont les nombres de Reynolds associés sont gigantesques si bien qu'il est informatiquement totalement inenvisageable de calculer exactement toutes les échelles de l'écoulement. La variabilité atmosphérique et océanique s'étend sur une très large gamme d'échelles de la micro-échelle $O(10^{-3}m, 10^{-3}s)$ à l'échelle globale $O(10^7m, 10^{10}s)$. Les interactions entre échelles, qui sont très fortes quelle que soit la partie du spectre que l'on considère, doivent être représentées si l'on souhaite simuler des écoulements de façon réaliste. Par conséquent, un modèle, dont la résolution est finie, devra inclure les interactions avec les échelles non-résolues de l'écoulement. Ces interactions sont calculées par des fermetures turbulentes qui correspondent à des paramétrisations sous-mailles plus ou moins empiriques. Ajoutons à cela que les fluides géophysiques sont contraints par la présence de frontières complexes (e.g. ; les côtes, montagnes ou fonds marins complexes) ce qui nécessite de nombreuses adaptations à fournir aux modèles et méthodes classiques de la mécanique des fluides. À titre d'exemples, la présence de côte a un impact direct sur l'ordre des schémas numériques utilisables, la bathymétrie/topographie accidentée imposera de s'intéresser aux erreurs de troncatures dans le calcul du gradient de pression, la stratification (problème de mélange diapycnal) et la cascade direct et inverse d'énergie entre échelles (propriétés de conservation et de dissipation des schémas) sont des contraintes fortes lorsque l'on conçoit des schémas d'advection pour les traceurs et la dynamique, etc.

Les outils de modélisation

Pour répondre à ces différents besoins sociétaux, les modèles numériques de l'océan et de l'atmosphère sont utilisés pour une large gamme d'applications sur des échelles spatio-temporelles très variées. Historiquement, deux grandes familles de modèles se distinguent : les modèles de circulation générale (GCM), conçus pour étudier la circulation à l'échelle globale avec des résolutions relativement grossières sur des échelles de temps longues, et les modèles régionaux (mésos et submésos-échelles) pour des études locales à haute résolution plus ponctuelles. Cette dichotomie s'est d'ailleurs ancrée jusque dans la communauté scientifique où la communauté climat et la communauté de modélisation régionale forment deux branches distinctes.

Schématiquement, un modèle numérique peut être vu comme l'union d'un cœur numérique, (idéalement) développé par les mathématiciens, et d'un jeu de paramétrisations des effets sous-maille, conçu par les physiciens, qui partagent un cadre informatique commun. La grande diversité dans les applications se retranscrit dans la diversité des modèles utilisés au sein de la communauté scientifique française. Le cœur numérique et les paramétrisations physiques de chaque modèle sont conçus pour être performants pour certains types de processus et/ou échelles caractéristiques cibles. Les modèles dont tout ou partie des développements numériques se font en France sont les suivants :

- Atmosphère : AROME/MESO-NH/Aladin/Arpège (Météo France), LMDZ/DYNAMICO (DYNAMical core on ICOSahedral Grid) (CNRS-LMD) , MAR (CNRS-LGGE). On peut ajouter à cette liste le modèle WRF (NCAR) développé principalement aux Etats-Unis mais largement utilisé au sein de la communauté française.
- Océan : HYCOM (SHOM), MARS (IFREMER), NEMO (CNRS-LOCEAN), ROMS (IRD/INRIA), SNH2012 (CNRS-LA), T-UGOm (CNRS-LEGOS).

Ces modèles se distinguent principalement par leurs hypothèses simplificatrices au niveau continu (équations primitives vs. Navier-Stokes compressible/incompressible/(quasi-)anélastique), leurs choix de coordonnées verticales (géopotentielle vs. pression vs. suivi de terrain vs. coordonnées hybrides ALE), leurs grilles horizontales (structuré vs. non-structuré vs. spectral), leurs algorithmes de discrétisation espace-temps (volumes finis vs. éléments finis vs. méthodes spectrale, ordre de précision, propriétés de monotonie et/ou de conservation) ainsi que dans leurs choix de paramétrisations physiques. Le développement de ces différents modèles est en perpétuelle évolution car la complexité des applications cible est elle-même en constante évolution. Dans la liste précédente, Arpège, LMDZ et NEMO sont des modèles globaux de climat utilisés par la communauté française pour contribuer aux simulations du GIEC (projet CMIP).

Fonctionnement actuel entre communautés

Dans le paragraphe précédent, il est mentionné que le cœur numérique des modèles devrait idéalement être le fruit du travail des mathématiciens. Cependant, cette approche n'est pas celle qui a été suivie lors du développement de la grande majorité (voire la totalité) des modèles. En effet, ce sont essentiellement des physiciens, qui se sont formés aux méthodes numériques sur le tas, qui ont conçu les cœurs numériques usuels. Pour expliquer cela, on peut avancer plusieurs raisons :

- Les modèles développés dans la communauté le sont sous la « tutelle » d'instituts de physique (e.g., INSU, IRD, etc) qui ne comptent donc aucun mathématicien parmi leurs effectifs. Dans ce contexte, le plus gros de la tâche du développement de modèles incombe aux Ingénieurs de Recherche rattachés à ces instituts. Ce type d'approche revient à considérer que la mise au point d'un modèle numérique relève de l'ingénierie et non de la recherche, ce qui est une vue extrêmement discutable.
- Du fait de la complexité de l'océan/atmosphère, une connaissance assez poussée du « fonctionnement » de ces fluides est requise pour développer des schémas numériques pertinents. Historiquement, dans la communauté française tout du moins, il a été implicitement considéré que l'approche la plus pragmatique était pour les physiciens de se former au numérique plutôt que de sensibiliser les mathématiciens aux spécificités de l'océan et de l'atmosphère.

Les deux raisons avancées précédemment pointent vers une origine commune : le cloisonnement des physiciens et des mathématiciens dans des sections ou instituts qui interagissent peu, voire pas. La pénurie de postes actuelle n'a fait que renforcer ce cloisonnement car les candidats avec des profils « transverses » sont souvent relégués au profit de candidats mieux « formatés » pour une section donnée. On pourrait aisément imaginer que des recrutements transverses (e.g. ; section CNRS 41 pour 19 et/ou poste fléché section 19 en numérique) permettraient de significativement faire avancer les choses.

Quelles qu'en soient les raisons profondes, les conséquences de ce cloisonnement sont visibles notamment dans le retard de la communauté française en terme de développement de modèles sur maillages non-structurés. Les interactions entre mathématiciens et physiciens sur la problématique de l'océan et de l'atmosphère sont encore sporadiques et le dialogue souvent long à installer. Cependant, des initiatives récentes vont dans la bonne direction : contrats communs INRIA-IRD et INRIA-Ifremer/Previmer, action LEFE-MANU, projet ANR COMODO, etc ..

Enjeux futurs pour les modèles

Une tendance forte actuellement avec l'avènement des super-calculateurs est d'augmenter encore et toujours la résolution des modèles. Par conséquent, de nombreux modèles numériques d'océan et d'atmosphère sont maintenant utilisés pour des applications très différentes de celles pour lesquelles ils ont été originellement conçus. Cela soulève un certain nombre de défis :

- Les modèles globaux vont prochainement atteindre des résolutions pour lesquelles les modèles régionaux ont été développés. Ceci va nécessiter de réexaminer en profondeur les choix numériques adoptés par ces modèles et définis comme le standard pour la communauté climat. De plus, une augmentation de la résolution se traduit par des non-linéarités plus marquées et des interactions plus fortes entre échelles qui rendent les modèles plus sensibles aux choix numériques. Conjointement, les processus paramétrés, par exemple ceux associés aux nuages, sont fortement dépendant des échelles. Par conséquent, les schémas de paramétrisation des modèles globaux à haute-résolution doivent se comporter très différemment de ceux développés pour la basse-résolution. De leur côté, les modèles régionaux commencent à être activement utilisés pour la régionalisation de scénarii climatiques sur des échelles de temps très longues très différentes des échelles habituellement traitées avec ces modèles. Le fossé de résolution en espace et en temps entre la communauté climat et la communauté régionale tend à se réduire, ce qui plaide pour un rapprochement progressif de ces deux branches.
- L'augmentation de la résolution affecte également la formulation des modèles au niveau continu, notamment pour les modèles régionaux hydrostatiques d'océan. En effet, à des résolutions de l'ordre de quelques dizaines de mètres, les effets quasi-hydrostatiques et non-hydrostatiques (voire de compressibilité) ne sont plus négligeables, ce qui nécessite de revisiter les hypothèses simplificatrices à l'origine de ces modèles.
- Les modèles numériques vont évoluer dans leur complexité en intégrant à leur cœur dynamique/physique des composantes de biogéochimie marine, sédiments/morphodynamique ou de chimie atmosphérique et leurs interactions. De plus, en domaine côtier, l'effet des vagues et les bancs découvrants devront être pris en compte. Pour les modèles globaux, les interactions atmosphère/glace continentale/glace de mer/océan jouent un rôle clé pour le climat.
- Bien que considéré avant tout comme un problème de physiciens, la formulation des paramétrisations physique sous-maille doit de plus en plus être considérée comme un sujet d'intérêt par la communauté des mathématiciens en collaboration avec les physiciens. Tout d'abord, les méthodes d'estimation de paramètres peuvent être d'une grande aide dans la conception de paramétrisations (cf x III.1.1.a), ainsi que les approches stochastiques. L'étude mathématique des interactions paramétrisations/dynamiques notamment en terme de régularité et existence/unicité des solutions et de maintien de certaines propriétés de conservation pourrait être instructive pour rendre les formulation des paramétrisations mieux posées. De plus, des modèles numériques tels que des modèles Large Eddy Simulation (LES) peuvent être utilisés soit directement dans les modèles sous forme de "super-paramétrisation" ou bien comme aide à la conception de schémas de paramétrisation. Enfin, comme mentionné précédemment, la mise en place de paramétrisations « scale-aware » est un enjeu crucial et un prérequis incontournable à l'utilisation de modèles définis sur maillages non-structurés à multi-résolution.

Dans une optique d'amélioration des modèles numériques, notons cependant que la tendance qui consiste à systématiquement aller vers une augmentation de la résolution des modèles dès que de la puissance de calcul est disponible peut être discutable. Lorsque l'on modélise des fluides aussi complexes que l'océan et l'atmosphère, accroître la résolution n'assure en rien que la solution physique obtenue sera qualitativement meilleure. Il serait très instructif, par exemple, d'utiliser cette puissance de calcul à une résolution fixe soit pour augmenter la complexité des méthodes numériques soit pour évoluer vers des approches statistiques (cf x III.1.2.a). L'amélioration des modèles numériques passe aussi par le développement systématique d'exercices d'inter-comparaisons dans des cas plus ou moins idéalisés afin d'évaluer objectivement les mérites et les défauts des différents choix numériques et physiques qui sont adoptés.

Défis mathématiques

Les enjeux futurs pour les modèles d'océan et d'atmosphère se projettent sur un certain nombre de défis mathématiques qui peuvent se décomposer en deux grandes parties :

- Analyse mathématique
 - ▶ Hypothèses de modélisation : choix des simplifications que l'on peut apporter aux équations en fonction des applications que l'on considère. Le système complet de départ correspond aux équations RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes). Les questions importantes pour les modèles d'atmosphère concernent principalement la prise en compte des effets compressibles (compressible vs. hypothèse (quasi)-anélastique). Pour les modèles d'océan, la prise en compte des effets non-hydrostatiques et des effets de compressibilité sont les sujets sensibles. Les hypothèses de modélisation influent directement sur les méthodes numériques utilisées en aval.
 - ▶ Propriétés de conservation : l'analyse des équations de départ des modèles permet d'identifier des invariants. Ces invariants peuvent ensuite être utilisés pour la conception de schémas numériques les conservant. Ces invariants sont généralement différents en fonction des hypothèses de modélisation.
 - ▶ Schémas de paramétrisation : la formulation mathématique des schémas de paramétrisation peut parfois être assez empirique et compromettre la régularité des solutions et la convergence des modèles avec la résolution. L'étude mathématique des schémas de paramétrisation pourrait permettre de dégager un certain nombre de critères assurant le bon comportement de ces schémas.
- Méthodes numériques
 - ▶ Hétérogénéité horizontale : la dynamique atmosphérique et océanique modélisée présente de fortes hétérogénéités spatio-temporelles. Lorsque l'on utilise une résolution constante en tout point du globe, des processus fondamentaux à petites échelles, ainsi que la position de la ligne de côte, sont représentés de manière très imprécise. Pour les modèles en grille structurée, la solution serait de passer par des maillages composites (e.g. ; overlapping composite grids, quad/octree) et/ou de gérer la ligne de côte via des méthodes de type cut-cells ou de frontières immergées pour éviter la représentation en marches d'escaliers de la côte. Les modèles 3D d'océan et d'atmosphère (autres que les modèles côtiers de type Saint-Venant) sur grilles non-structurées n'ont encore pas atteint le stade de maturité des modèles structurés. Cependant, des avancées récentes justifient de pousser plus loin la réflexion dans cette direction. L'utilisation de maillages icosaédriques est très en vogue actuellement pour les modèles globaux d'atmosphère afin d'éviter les singularités du maillage aux pôles. Ceux-ci sont, pour le moment, essentiellement configurés avec une résolution constante.
 - ▶ Coordonnées verticales : le choix de la coordonnée verticale a généralement un impact important sur la solution physique des modèles notamment en cas de topographie accidentée ou de forte stratification (e.g. ; le problème de mélange diapycnal dans l'océan). Chaque système de coordonnée présente ses avantages et ses inconvénients suivant le type de processus que l'on souhaite modéliser. Une tendance forte actuellement est d'essayer de tirer les avantages de plusieurs systèmes de coordonnées dans un seul système hybride. La conception de ce type de coordonnée hybride

s'appuie généralement sur des méthodes ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian). Des problèmes théoriques et pratiques se posent encore actuellement avec ce type d'approche qui nécessite une recherche active dans ce sens.

- ▶ Décomposition en modes lents/rapides : les modèles d'océan et d'atmosphère qui relâchent la contrainte d'incompressibilité se retrouvent confrontés au problème de la propagation des ondes acoustiques. La rapidité de ces ondes impose une contrainte forte sur le pas de temps si des schémas explicites en temps sont utilisés. Actuellement, il y a trois types de méthode pour traiter le mode acoustique rapide : split-explicit, implicite ou IMEX (i.e. semi-implicite). Les méthodes IMEX et implicites nécessitent des solveurs de type Helmholtz ou Poisson à chaque pas de temps. Ces solveurs peuvent parfois poser des problèmes de scalabilité dans un contexte HPC. Pour le moment, il n'y a pas de choix clair qui se dégage entre ces différentes approches en terme d'impact sur la solution physique et les différences majeures semblent se trouver au niveau de la scalabilité de ces méthodes.
- ▶ Schémas espace-temps : une très grande variété de schémas numériques est utilisée dans les modèles. Ces schémas se discriminent en fonction de leur approche (eulérienne vs semi-lagrangienne), de leurs propriétés de conservation (conservation de l'énergie, vorticité potentielle et/ou de l'enstrophie), de leur ordre de précision (ordres 1 à 5) et de leurs propriétés de monotonie, positivité ou TVD (notamment pour les traceurs (biogéo)-chimiques). Il est assez compliqué d'avoir une idée claire des choix les plus appropriés. Le développement de méthodes et outils diagnostiques d'évaluation des propriétés de dispersion/dissipation des différentes approches serait nécessaire pour rationaliser ces choix. De plus, la mise en place de méthodologies d'étude des schémas numériques au plus près des conditions dans lesquelles ils sont utilisés en pratique (i.e. étude espace-temps en présence de nonlinéarités) serait d'une grande aide. Des propriétés supplémentaires (e.g. de capture de chocs) pourraient être requises pour certaines études.
- ▶ Modélisation non-hydrostatique / LES : les modèles numériques non-hydrostatiques de l'océan et de l'atmosphère peuvent théoriquement être utilisés pour simuler directement la turbulence sans choix arbitraires de paramétrisations. Dans ce cas, les paramétrisations sous-maille des modèles RANS sont remplacées par des filtres passe-bas pour ainsi permettre des simulations de type LES. Ce genre de simulation peut permettre d'accroître notre connaissance des fluides stratifiés-tournants et par conséquent serait potentiellement très utile pour concevoir ou revisiter des paramétrisations sous-maille.

Initiatives en cours afin d'encourager les échanges

Afin d'aborder de la manière la plus efficace possible les différents enjeux mentionnés ci-dessus un exemple d'approche communautaire structurante est celui du projet ANR COMODO⁶ (COmmunauté de MODélisation Océanographique). La communauté française de modélisation de l'océan s'est structurée depuis 2011 autour de ce projet qui regroupe l'ensemble des modélisateurs qui contribuent au développement d'un code numérique d'océan aussi bien global que régional. Ce projet a pour objectif :

- d'encourager les échanges au sein de la communauté,
- de mettre en place les éléments permettant la validation / l'intercomparaison des modèles via des cas-tests idéalisés définis en accord avec les physiciens,
- de mettre en commun les moyens humains pour les développements informatiques et numériques lourds et de favoriser l'émergence d'un ensemble d'outils communs,
- de définir les contours des évolutions nécessaires pour les modèles de futur génération.

⁶ <http://indi.imag.fr/wordpress/>

Aux Etats-Unis, un projet très similaire a été mis en place en 2012 au sein de la communauté des atmosphériciens : le projet DCMIP⁷ (Dynamical Core Model Intercomparison Project).

Sous l'égide de LEFE-MANU, une journée « cœurs numériques des modèles atmosphériques et océaniques »⁸ a eu lieu en octobre 2012 afin d'amorcer un dialogue entre les communautés françaises de modélisateurs de l'océan et de l'atmosphère. Cette journée a débouché sur la mise en place en commun d'une formation « modélisation des fluides géophysiques » qui sera offerte par l'école doctorale de Grenoble fin 2013.

⁷ <http://www.earthsystemcog.org/projects/dcmip/>

⁸ http://www-ljk.imag.fr/LEFE_MANU/Actualities//1342184723406_/CoeursNumeriques_Annonce.pdf